



TITLE:

# HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

廣瀬, 崇至

---

CITATION:

廣瀬, 崇至. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2017, 2016: 43-43

ISSUE DATE:

2017-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/227975>

RIGHT:

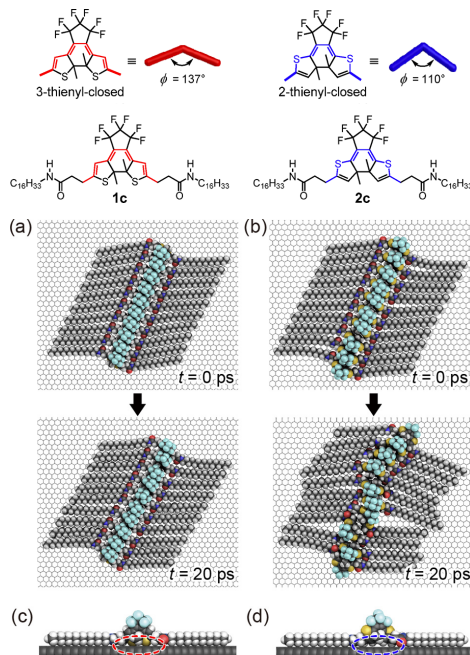
HOPG 基板上における分子配列のモデリング  
Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 廣瀬 崇至

研究成果概要

単一の分子を電子素子として応用することを目指す分子エレクトロニクス分野は、より高度な動作原理をもつデバイスおよび究極の省エネルギーデバイスを実現する観点から近年大きな注目を集めている。本研究では、フォトクロミック分子であるジアリールエテン **1** および **2** の分子配列をグラファイト基板上において観測し、その光応答性を検討した。

化合物 **1** と **2** の閉環体は、チエニル基の置換位置に由来して曲がり角が大きく異なる分子構造を有している。Materials Studio を用いた分子動力学計算により、化合物 **2c** と比較して化合物 **1c** はより安定な分子配列を形成することが示唆された (Figure 1)。化合物 **1** の開環体および閉環体の分子配列形成プロセスが高い協同性を有することに由来して、数%の僅かな光異性化反応によって完全な分子配列の形成・消失を誘起できることが明らかとなり、3 段階の分子配列状態を高感度かつ可逆に光制御することが可能となった (Figure 2)。

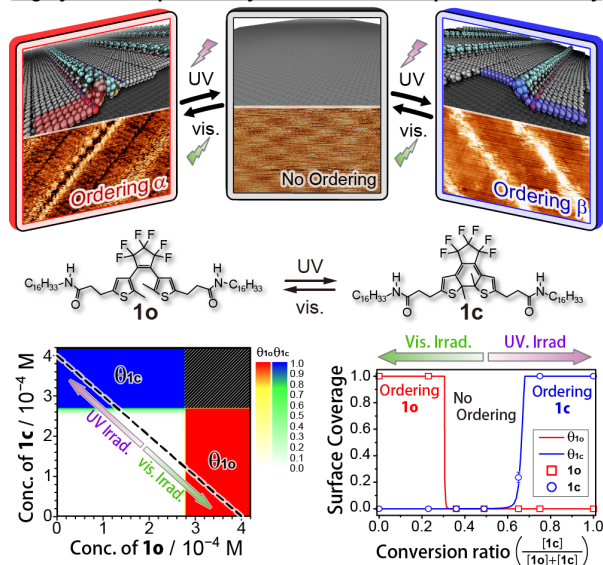


**Figure 1.** Molecular dynamics (MD) simulations of the orderings of 10 molecules of **1c** and **2c** on graphite substrate during 20 ps (force field: Dreiding).

発表論文(謝辞なし)

1. N. Maeda, T. Hirose, S. Yokoyama, K. Matsuda, *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 9317–9325.
2. N. Maeda, T. Hirose, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, in press.

Highly Photoresponsive System based on Cooperative Assembly



**Figure 2.** Phototriggered transformation of molecular orderings formed at the octanoic acid/graphite interface, which is caused by photoisomerization reaction of photochromic diarylethene.